



TITLE:

分子論に於ける群論的方法

AUTHOR(S):

鳴海, 元

CITATION:

鳴海, 元. 分子論に於ける群論的方法. 京都大学化研講演集 1949, 17: 84-85

ISSUE DATE:

1949-03-05

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/73883>

RIGHT:

の抑制作用の内容を窺知する一根據になるのではないかと思われる。

4) 次に芳香族化合物の halogen 誘導體の影響を観察する爲に chlorobenzene, bromobenzene, bromophenol 及び diiodotyrosine に就いて其の作用を検べた。Bromobenzene (0.31 mole) 及び bromopheno (0.29 mole) は著明に酸性酵素を抑制するが, chlorobenzene (0.31 mole) の影響は見られない。

5) Diiodotyrosine (0.032—0.256 mole) は酸性酵素に依る gelatine 水解を著明に抑制するが peptone 水解の影響は見られない。是は非常に特性がある様に考えられるので研究を続けている。鹼性酵素に依る peptone 水解はこの程度の添加濃度では殆ど影響がない様に思われる。

分子論に於ける群論的方法

鳴 海 元

量子力學に於ける群論的方法は、對稱問題の考察を本質的に一般化し、複雑なる形象の運動學的性質を統一的に演繹出來ることは周知の如くであるが、吾々は斯る方法に基き、量子力學的系に於ける同種個體の共鳴現象に關し、就中分子系に特有なる問題として、等核の置換縮退を含む形象の解析を試みたいと思う。

系の Hamiltonian を不變ならしめる變數變換の集合は、その系の對稱性を規定する、群を構成する。就中同種固定核の空間對稱に注目すれば、それらの等核の置換に對應して、三次元の全廻轉鏡映群の部分群、所謂分子の廻轉群 \mathfrak{G} が生成する⁽¹⁾かくして分子系の量子化に基く全準位には、斯る \mathfrak{G} の既約表示が附屬し、その表示の種類によつて各準位の縮退度、並びに之に屬する波動函數の變換性が得られる。

そこで分子系の全状態を記述する固有函數は、解の近似如何に拘らず、核座標の交換に對して、その核スピンの整数なるか半奇數なるかに從つて對稱的 (Bose 統計) 或いは反對稱的 (Fermi 統計) でなければならぬことが要請される⁽²⁾所がこの系の Schrödinger 方程式の固有値問題は、近似的に電子座標と核座標とを分離し⁽³⁾、更に後者は第零次近似として逆進、振動廻轉に關する項と、核のスピンの關する項とに夫々分離して解き得るから、全状態はこれらの各々の解の直積として與えられる。從つてこれらの解の中で上記の要請を滿足する状態を決定するためには、その各々の固有函數を基底として、群 \mathfrak{G} によつて誘起される各々の表示の直積から得られる積表示を \mathfrak{G} の既約表示に簡約して、Bose 粒子に對しては恒等表示: Λ_1 或いは Λ_{1g} ⁽⁴⁾ (後者は第2種廻轉元素を含む群に就て得られる)、Fermi 粒子に對しては反對稱表示:

$$\Lambda_2(\mathfrak{G} = C_{3v}T_d), \Lambda_{2g}(\mathfrak{G} = D_{3v}), \Lambda'_1(\mathfrak{G} = D_{\infty v})$$

$$\Lambda_{2u}(G = O), B_2'(G = C_{2v})$$

に属するものを撰ばねばならない。但し核置換の次数は、群 \mathfrak{G} を等核の置換の群に（一般には類型に）寫像することによつて理解される。

以上の考察から得られる物理的歸結の中で、先づ全エネルギー單位の量子重價が一般的に與えられ⁽⁶⁾、就中任意のスピンを有する等核系の赤外吸収或いは Raman スペクトルの廻轉線の強度化が得られる。更に斯る分子系の分配函數が任意の溫度に對して一般的に求められる⁽⁷⁾之から必然的に得られる核スピン異性體は、全く \mathfrak{G} の種類に從つて規定され、それらの存在確率比は更にスピンの大いさに依つて異なる（次の報告参照）。同時に高溫度に於いて斯る核スピン異性體を區別することなく分配函數に於けるその直和をとれば、Ehrenfest の導入せる分子の對稱數⁽⁸⁾が得られる。之は分子系の實廻轉の群を等核の置換の群に類型に寫像し得る元素の數として古典的意義を保つことになる。

参 考 文 献

- 1) R.S.Mulliken, *Phy&. Rev.* **43**(1933), 279.
J.E.Rosenthal and G.M.Murphy, *Rev. Mod. Phys&.* **8**(1936), 317.
H.Sponer and E.feller, *ibid.* **13**(1941), 75.
- 2) W.Heisenberg, *Zeit&. f.Phy&.* **41**(1927), 239.
P.Ehrenfest and J.R.Oppenheimer, *Phy&. Rev.* **37**(1931), 333
- 3) M.Born and J.R.Oppenheimer, *Ann.d.Phy&.* **84**(1927), 475.
R.Renner, *Zeit&. f. Phy&.* **92**(1934), 172.
後者は線型分子に對する斯る分離に對して近似計算を進めているが、之に就ては機會を改めて論ずる。
- 4) Ref (1)の Mulliken の記號を用ふ。
- 5) 群論によらぬ一般的取扱に就ては、F. Hund, *Zeits. f. Phys.* **43**(1927), 788, 805.
核振動に就ては、E. Wigner, *Gött. Nachr.* (1933), 133, L. Tisza, *Zeits. f. Phys.* **82** (1933), 48 ;
W. H. Shaffer, *Rev. Mod. Phys.* **16**(1944), 245.
廻轉に就ては、E.B.Wilson, *J. chem. Phys.* **3** (1935), 276 ; A. W. Mare, *Ann. d. Phys.* **30** (1936), 555.
- 6) 筆者, "スピン函數とその變換性" (日本物理學會, 關西支部講演會, 昭和22年10月).
- 7) H. Luidloff, *Zeits. f. Phys.* **57**(1929), 227.
- 8) P. Ehrenfest, *Ann. d. Phys.* **65**(1921), 609.

多原子分子に於ける核スピン異性體に就て

鳴海 元・徳岡 善助

熱平衡にある水素分子が一定の存在比を以て互に遷移確率の極めて小さいオルト、パラの二分子種(状態)の集合として理解されたことは周知の如くであるが、吾々は斯る核スピン異性體